

Elastic Softening in Superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

권태송, 김철구
연세대학교 물리학과, 서울 120-749

남균
연세대학교 물리학과, 강원 222-701

고온초전도체 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 의 온도에 따른 Elastic Constant 를 전자기어를 고려하여 이론적으로 계산하였다. 계산 결과는 지금까지 설명할 수 없었던 온도가 낮아짐에 따라 C_{66} 가 softening 이 일어나는 실험적인 결과를 설명할 수 있었다. 따라서 고온초전도체가 되는 중요한 역할은 p-hole 임을 알아내었다.

1. 서론

고온초전도체 $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4$ 는 223 K 에서 tetragonal 구조에서 Orthorhombic 구조로 구조변환이 일어난다. 최근에 A. Miglioru [1] 등은 이러한 초전도체의 tetragonal 구조에서의 Elastic Constant 를 온도에 따라 측정하였다. 그 결과 오직 Elastic Constant C_{66} 만이 매우 큰 Softening 을 나타내며, 다른 Elastic Constant 들은 softening 현상을 나타내지 않는다는 것을 발견하였다. 본 연구에서는 초전도체의 phonon softening 현상에 대하여 다루고자하며 이와같은 초전도체의 normal state property 에 대한 연구는 초전도체의 electronic structure 와 초전도 mechanism 을 규명하는데에도 매우 중요하다.

2. Elastic Constant 의 온도의존성

Elastic Constant 의 온도의존성을 계산하기 위해서는 먼저 초전도체내의 energy band 와 strain tensor 와의 상호작용 Hamiltonian 을 유도하여야되며 이와같이 하기 위해서는 초전도체의 electronic structure 에 대한 적당한 Model Hamiltonian 을 가정하여야된다. 본 연구에서는 고온초전도체의 electronic structure 가 다음과 같은 Anderson impurity Hamiltonian [5] 으로 주어진다고 가정한다. 즉,

$$H = \sum_{\vec{k}_0} E(\vec{k}) C_{\vec{k}_0}^{\dagger} C_{\vec{k}_0} + \sum_{i\vec{k}_0} V_{i\vec{k}_0} [C_{\vec{k}_0}^{\dagger} d_{i0} + C_{\vec{k}_0} d_{i0}^{\dagger}] + \sum_{i0} \epsilon_{i0} d_{i0}^{\dagger} d_{i0} + U \sum_{i0} n_{i0} n_{i-0} \quad (1)$$

따라서, d 원자내 hole 들의 Coulomb repulsion 이 매우 크므로 Itinerant carrier 는 p-hole 이라고 생각할수있으며[6] 근사적으로 Cu-atom 내의 d-orbital 과 산소 원자내의 p-orbital 이 weak 하게 couple 되어 있다고 가정할수있다. 따라서 산소원자내의 p_x, p_y

-orbital 들은 nearly degenerated 된 상태에 존재하게되며[3,4] 이러한 경우 산소원자내의 p-hole 과 strain 과의 상호작용 Hamiltonian 은 다음과 같다.

$$H' = \begin{pmatrix} G_{11}^e e_{xx} + G_{22}^e e_{yy} + G_{33}^e e_{zz} , & G_3^e e_{xy} \\ G_3^e e_{xy} , & G_{11}^e e_{xx} + G_{22}^e e_{yy} + G_{12}^e e_{zz} \end{pmatrix} \quad (2)$$

따라서, 위의 Hamiltonian 으로 부터 우리는 strain e_{xx} , e_{yy} , e_{zz} 에의해서는 p-hole state 들의 shift 만이 일어난다는 것을 알수있으며 결과적으로 초전도체의 Elastic softening 에는 기여 하지 않는다는 것을 알수있다. 그러나, 초전도체에 Orthorhombic strain e_{xy} 를 가했을 경우에는 doubly degenerate 되어있는 p-hole state 가 갈라지면서 carrier redistribution 이 일어나게 되므로 Elastic Constant C_{66} 은 softening 을 나타낼 수 있음을 알수있다. 이러한 계산결과는 실험사실을 잘 설명할 수 있다.

3. 결 론

Tetragonal 구조에서 Elastic Constant C_{66} 이 온도가 감소함에 따라 감소하는 현상은 다음과 같이 설명할수있다. 즉, Cu-atom 내의 strong Coulomb repulsion 때문에 생긴 Charge transfer gap 으로 인하여 CuO-plane 내의 Cu d-orbital 과 Oxygen p-orbital 들이 서로 weak 하게 couple 된다. 따라서 이러한 경우 Oxygen p_x, p_y -orbital 들은 Nearly degenerate 되게 되며 이러한 degenerate 된 p_x, p_y -orbital 들은 strain e_{xy} 에 의해서 갈라지게 된다. 따라서, 이러한 갈라진 energy level 들간의 carrier redistribution 으로 인하여 Elastic Constant C_{66} 이 온도가 감소함에 따라 감소하는 Elastic softening 현상을 나타내게된다.

참고문헌

- [1] A. Migliori, W. M. Visscher, S. Wong, S. E. Brown, I. Tanaka, H. Kojima and P. B. Allen Phys. Rev. Lett. 64, 2458 (1990).
- [2] E. Dieulesaint and D. Royer, *Elastic Waves in Solids*, John Wiley & Sons (1980).
- [3] A. K. McMahan, R. M. Martin, S. Satpathy Phys. Rev. B38, 6650, (1988).
- [4] P. Entel and J. Zielinski, Phys. Rev. B42, 307 (1990).
- [5] D. M. Newns, P. C. Pattnaik and C. C. Tsuei, Phys. B43, 3075 (1991).
- [6] W. Weber, Z. Phys. B70, 323 (1988).